

# ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ГАЛОГЕНИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ В СОЛЕВЫХ РАСПЛАВАХ ТИПА $\text{MX}_2$ И $\text{MX}_3$

Давыдов А.Г.<sup>(1)</sup>, Пешкина К.Г.<sup>(2)</sup>, Ткачев Н.К.<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

<sup>(2)</sup> Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

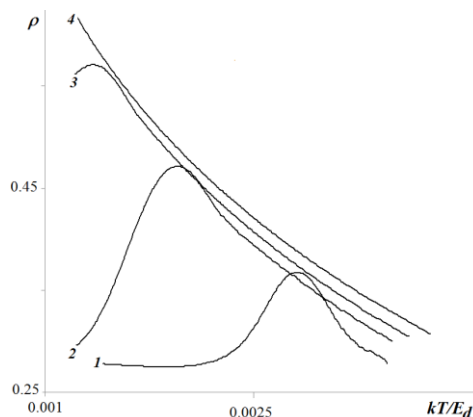
В докладе будет представлен анализ химического равновесия по отношению к диссоциации заряженных комплексных анионов на примере модели заряженных твердых сфер, учитывающей размеры простых и комплексных ионов в солевых расплавах. Показано, что химическое равновесие по отношению к образованию или диссоциации комплексных анионов в солевых расплавах определяется конкуренцией между энергий диссоциации комплекса с электростатическими взаимодействиями всех ионов (простых и комплексных) в расплаве.

В рассматриваемом случае мы опирались на принцип минимума свободной энергии. За положение этого минимума отвечают две независимые переменные: средняя атомная плотность и концентрация автокомплексов. Приравняв производные свободной энергии по этим переменным нулю, получим полные условия равновесия рассматриваемой системы с химической реакцией комплексообразования:

$$\begin{cases} \left( \frac{\partial \Delta G}{\partial n_c} \right)_{V,T} = 0 \\ \left( \frac{\partial \Delta G}{\partial V} \right)_{n_c,T} = 0 \end{cases}$$

Первое уравнение системы представляет собой обобщенный закон действующих масс. Второе выражение описывает уравнение состояния, т.е. связь плотности с внешним давлением и температурой.

Рассчитаны возможные типы температурной зависимости концентрации комплексов и плотности на примерах галогенидных расплавов двух- и трех- валентных металлов. На рисунке представлены рассчитанные температурные зависимости атомной плотности галогенидного расплава трехвалентного металла для различных значений энергии диссоциации комплекса типа  $(\text{MX}_6)^{3-}$ .



Рассчитанные температурные зависимости плотности расплава типа  $\text{MX}_3$  для различных значений энергий диссоциации: 1 –  $E_d^0 = 9e^2/\epsilon a$ ; 2 –  $E_d = 0.9E_d^0$ ; 3 –  $E_d = 0.85E_d^0$ ; 4 –  $E_d \leq 0.8E_d^0$ .

## СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ ОКСИДОВ $\text{LnSr}_2\text{CuTiO}_{6.5}$ ( $\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Pr}$ )

Деева Ю.А.<sup>(1,2)</sup>, Чуахина Т.И.<sup>(2)</sup>, Мельникова Н.В.<sup>(1)</sup>, Яковлева Е.А.<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

<sup>(2)</sup> Институт химии твердого тела УрО РАН

620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

Диэлектрическая проницаемость является одним из основных параметров вещества, используемого при разработке емкостных устройств, в связи с чем применение материалов с высокой диэлектрической проницаемостью позволяет существенно снизить их физические размеры.

Синтез твердых растворов  $\text{LnSr}_2\text{CuTiO}_{6+\delta}$  ( $\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Pr}$ ), осуществляли по прекурсорной методике, используя в качестве исходных реагентов  $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$ ,  $\text{CuO}$ ,  $\text{Nd}_2\text{O}_3$  и  $\text{Pr}_6\text{O}_{12}$ . Оксиды растворяли, смешивали и добавляли 1.25 – кратный избыток глютаминовой кислоты. Продукты, полученные после сгорания органической составляющей, выдерживали 5 часов при 670 °С, затем прессовали в таблетки и прокаливали 8 ч при температуре 1060 °С.